Optimalizace

Pseudoinverze

Tomáš Kroupa

FEL ČVUT

Motivace: řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$

Řešení $\mathbf{x}^*$ s nejmenší normou

Když má $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé řádky, pak $\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^\top(\mathbf{A}\mathbf{A}^\top)^{-1}\mathbf{b}$

Řešení $\mathbf{x}^*$ ve smyslu nejmenších čtverců

Když má $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé sloupce, pak $\mathbf{x}^* = (\mathbf{A}^\top\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\top\mathbf{b}$

- Chceme najít jednotný popis pro řešení obou úloh a odstranit předpoklad lineární nezávislosti
- V **lineární algebře** si klademe otázku, jak zkonstruovat "inverzi" libovolné matice $\mathbf{A}$

Singulární rozklad matice

Věta (SVD)

Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $p := \min\{m, n\}$. Potom existuje

- diagonální matice $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s diagon. prvky $s_1, \ldots, s_p \geq 0$,
- ortogonální matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ a $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ splňující

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^\mathsf{T}$$

- Nenulová singulární čísla jsou $s_1, \ldots, s_r > 0$, kde $r := \operatorname{rank} \mathbf{A}$, definujme $\mathbf{D} := \operatorname{diag}(s_1, \ldots, s_r)$
- Označme prvních r sloupců: $\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_2 \end{bmatrix}$, $\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_1 & \mathbf{V}_2 \end{bmatrix}$
- Potom platí

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_1\mathbf{D}\mathbf{V}_1^\mathsf{T}$$

SVD a ortogonální projektory

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_1 \mathbf{D} \mathbf{V}_1^\mathsf{T}$$

Sloupce matice $\mathbf{U}_1$ tvoří ortononormální bázi prostoru $\operatorname{rng} \mathbf{A}$:

Tvrzení

Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Ortogonální projektor na

- prostor $\operatorname{rng} \mathbf{A}$ je matice $\mathbf{U}_1 \mathbf{U}_1^\mathsf{T}$
- prostor $\operatorname{rng} \mathbf{A}^\mathsf{T}$ je matice $\mathbf{V}_1 \mathbf{V}_1^\mathsf{T}$

Pseudoinverzní matice

Definice (Moore–Penrose)

Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$. Pseudoinverze matice $\mathbf{A}$ je

$$\mathbf{A}^{+} := \mathbf{V}_1 \mathbf{D}^{-1} \mathbf{U}_1^{\mathsf{T}} \in \mathbb{R}^{n \times m}.$$

- Pro $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ klademe $\mathbf{A}^{+} := \mathbf{0}^{\mathsf{T}}$
- Definice je korektní, i když SVD rozklad není jednoznačný

Tvrzení

Matice $\mathbf{A}^{+}$ je jedinou maticí splňující tyto identity:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{+}\mathbf{A},\ \mathbf{A}^{+} = \mathbf{A}^{+}\mathbf{A}\mathbf{A}^{+},\ \mathbf{A}\mathbf{A}^{+} = (\mathbf{A}\mathbf{A}^{+})^{\mathsf{T}},\ \mathbf{A}^{+}\mathbf{A} = (\mathbf{A}^{+}\mathbf{A})^{\mathsf{T}}$$

Pseudoinverzní matice – vlastnosti

Tvrzení

Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ platí:

1. Je-li $\mathbf{A}$ regulární, potom $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^{-1}$.
2. $(\mathbf{A}^+)^+ = \mathbf{A}$
3. $(\mathbf{A}^+)^\mathsf{T} = (\mathbf{A}^\mathsf{T})^+$
4. $\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A})^+\mathbf{A}^\mathsf{T}$

Speciální případy

- Jsou-li sloupce $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé, pak $\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^\mathsf{T}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^\mathsf{T}$
- Jsou-li řádky $\mathbf{A}$ lineárně nezávislé, pak $\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^\mathsf{T}(\mathbf{A}\mathbf{A}^\mathsf{T})^{-1}$

Pseudoinverze – příklady

Příklad 1 (vektor)

$$\mathbf{a}^{+} = \frac{1}{\mathbf{a}^{\mathsf{T}}\mathbf{a}}\mathbf{a}^{\mathsf{T}} \quad \text{pro } \mathbf{a} \neq \mathbf{0}, \qquad \mathbf{a}^{+} = \mathbf{0}^{\mathsf{T}} \text{ pro } \mathbf{a} = \mathbf{0}$$

Příklad 2 (matice $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ s ortonormálními sloupci)

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{I}\mathbf{I} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{U}^{+} = \mathbf{U}^{\mathsf{T}}$$

Příklad 3

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} 1 \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} = \mathbf{A}^{+}$$

Pseudoinverze a ortogonální projektory

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_1 \mathbf{D} \mathbf{V}_1^\mathsf{T}$$

Tvrzení

Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Ortogonální projektor na

- prostor $\operatorname{rng} \mathbf{A}$ je matice $\mathbf{A}\mathbf{A}^+$
- prostor $\operatorname{rng} \mathbf{A}^\mathsf{T}$ je matice $\mathbf{A}^+\mathbf{A}$
- prostor $\operatorname{null} \mathbf{A}$ je matice $\mathbf{I} - \mathbf{A}^+\mathbf{A}$

Řešení s nejmenší normou

Věta

Nechť $X \neq \emptyset$ je množina řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Potom

$$X = \mathbf{A}^{+}\mathbf{b} + \operatorname{null}\mathbf{A}$$

a vektor $\mathbf{A}^{+}\mathbf{b}$ je jediným řešením úlohy

$$\min\left\{\|\mathbf{x}\|_2 \mid \mathbf{Ax} = \mathbf{b}\right\}.$$

Řešení ve smyslu nejmenších čtverců

Věta

Nechť X je množina řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ ve smyslu nejmenších čtverců. Potom

$$X = \mathbf{A}^+\mathbf{b} + \operatorname{null}\mathbf{A}$$

a vektor $\mathbf{A}^+\mathbf{b}$ je jediným řešením úlohy

$$\min\left\{\|\mathbf{x}\|_2 \mid \mathbf{x} \in X\right\}.$$

Shrnutí

Soustava $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

- Má-li řešení, potom je $\mathbf{A}^+\mathbf{b}$ jejím řešením s nejmenší normou
- Nemá-li řešení, potom je $\mathbf{A}^+\mathbf{b}$ jejím řešením ve smyslu nejmenších čtverců a navíc s nejmenší normou

Jak na to v MATLABu?

- Příkaz `pinv(A)*b` spočte vektor $\mathbf{A}^+\mathbf{b}$
- Nemá-li soustava řešení, pak příkaz `A\b` spočte vektor $\mathbf{A}^+\mathbf{b}$
- Jinak příkaz `A\b` najde řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, které má nejvýše m nulových souřadnic, kde $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$

Reference

T. Werner. *Optimalizace* (kapitola 5). Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2020.

M. Hladík. *Lineární algebra (nejen) pro informatiky*. Matfyzpress, 2019.

J. Velebil. *Abstraktní a konkrétní lineární algebra.* Elektronická skripta. FEL ČVUT, 2019.